



Übungsblatt 13 – Zur klassischen Beschreibung der Atome

Abgabe: Fr 09.07.2010 (bis 12:00 Uhr im Briefkasten auf N3)

Besprechung: Fr 16.07. 12:00 Uhr – 13:30 Uhr im Sondertermin (anstelle Vorlesung)

1. Zur Dirac-Gleichung

(a) Berechnen Sie explizit (für $l, m=x, y, z$) den Antikommutator der Pauli-Matrizen des Spins. Zeigen Sie dadurch:

$$[\hat{\sigma}_l, \hat{\sigma}_m]_+ := \hat{\sigma}_l \hat{\sigma}_m + \hat{\sigma}_m \hat{\sigma}_l = 2\delta_{lm}$$

(b) Mit Hilfe der Pauli-Matrizen $\hat{\sigma}_i$ ($i = x, y, z$) werden nun vier 4×4 Matrizen α_i und β definiert:

$$\alpha_i = \begin{bmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ \hat{\sigma}_i & 0 \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad \beta = \begin{bmatrix} \hat{1}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & -\hat{1}_{2 \times 2} \end{bmatrix}$$

Zeigen Sie, daß sich durch Quadrieren des Matrix-Ausdrucks $\vec{\alpha} \cdot c\vec{p} + \beta m_0 c^2$ die relativistische Energie-Impuls Beziehung $E^2 = (m_0 c^2)^2 + (c\vec{p})^2$ ergibt.

Bemerkung zum allgemeinen Hamilton-Operator der Atomspektroskopie:

Aus der relativistischen Quantenmechanik (*Dirac-Gleichung*) läßt sich folgender Hamilton-Operator für Elektronen in *zeitlich konstanten* elektromagnetischen Feldern auf direktem Wege herleiten, der auf die sog. Breit-Pauli Gleichung führt:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right)^2 + e\varphi(\vec{r}) + V(r) + \frac{e}{m} \hat{\vec{S}} \cdot \vec{B}(\vec{r}) + \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}$$

In der Vorlesung wurde er stückweise aus der Pauli-Gleichung sowie dem Prinzip der *minimalen Kopplung* aufgebaut, wobei die Spin-Bahn-Kopplung als eine der relativistischen Korrekturen hinzugefügt wurde. Er wird der zentrale Ausgangspunkt der verbleibenden Übungsaufgaben sein.

In der folgenden Aufgabe lassen wir das Magnetfeld $\vec{B}(\vec{r}) = \nabla \times \vec{A}(\vec{r})$, sowie das elektrische Feld $\vec{E}(\vec{r}) = -\nabla\phi(\vec{r})$ jedoch noch ausgeschaltet:

2. Zur Feinstruktur des Wasserstoffatoms

Durch die Wechselwirkung der magnetischen Momente des Bahndrehimpulses und des Spins kommt es zur sog. Spin-Bahn-Kopplung, die zur Feinstrukturaufspaltung der Energieniveaus beiträgt. Ein Wasserstoffatom werde dabei durch folgenden Störoperator gestört (mit α als Feinstrukturkonstante):

$$\Delta \hat{H}_{SL} = \lambda \frac{\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}}{r^3}$$

(a) Berechnen Sie die Kopplungskonstante λ für ein Atom mit Kernladungszahl Z .

– bitte wenden –

(b) Wie lautet der allgemeine Erwartungswert $\langle \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}} \rangle$ bzgl. einer beliebigen Wellenfunktion $|n, l, m, s\rangle$ des Wasserstoffatoms? Zeigen Sie zunächst, daß sich mit Hilfe des Operators für den Gesamtdrehimpuls $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$ schreiben lässt:

$$\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}} = \frac{1}{2}[\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2]$$

(c) Berechnen Sie den quantenmechanischen Erwartungswert $\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle$ für ein $2p$ -Elektron (mit normiertem Radialanteil $R_{2p}(r) = \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{1}{2a}\right)^{\frac{5}{2}} \cdot r e^{-\frac{r}{2a}}$ und a als Bohrscher Radius).

(d) Berechnen Sie die durch die Spin-Bahn Kopplung hervorgerufene Änderung des $2p$ Energieniveaus in 1. Ordnung *nichtentarteter* Störungsrechnung, d.h. berechnen Sie den Erwartungswert $\langle \Delta \hat{H}_{SL} \rangle$ des Störoperator bzgl. der $2p$ Wellenfunktion $|2, p, m, s\rangle$ des Wasserstoffatoms.

Hinweis: Man verwendet mit Vorteil die Ergebnisse aus Aufgabenteil (b) und (c).

(e) Welche Werte kann die Gesamtdrehimpulsquantenzahl j im Falle eines $2p$ Elektrons des Wasserstoffatoms annehmen? Wie groß ist demnach die Feinstrukturaufspaltung des $2p$ Energieniveaus? Veranschaulichen Sie das Ergebnis mit Hilfe einer Skizze.

3. Zum anomalen Zeeman-Effekt – eigentlich der normale Fall

(a) Aufgrund der quantenmechanischen Kopplung des Spins und des Bahndrehimpulses zum Gesamtdrehimpuls $\vec{J}$ bestimmt im allgemeinen der Landé-Faktor g_j die Grösse der Zeeman-Aufspaltung. Für welchen Spezialfall ergibt sich der auch klassisch beschreibbare *normale* Zeeman-Effekt?

(b) Wie groß ist die Feinstrukturaufspaltung der D-Linie des Natrium-Atoms? Bestimmen Sie zunächst die Energieänderung der beiden beteiligten Energieniveaus $3^2P_{1/2}$ und $3^2P_{3/2}$ im anomalen Zeeman-Effekt.

4. Der Paschen-Back-Effekt – Rechtfertigung semi-klassischer Näherungen

Gegeben sei das Spektrum $\epsilon_{n,l}$ und die Eigenvektoren $|n, l, m, m_s\rangle$ für ein Elektron in einem Atom, das als Einteilchensystem (mit Spin) behandelt werden kann.

(a) Zeigen Sie ausgehend von der Breit-Pauli Gleichung:

Unter Vernachlässigung der Spin-Bahn Kopplung (d.h. für $\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} = 0$) ist die Störung durch ein äußeres homogenes Magnetfeld $\vec{B}_0$ gegeben durch

$$\hat{H}_1 = \mu_B \vec{B}_0 \cdot (\hat{\vec{L}} + 2\hat{\vec{S}}).$$

(b) Berechnen Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren in erster Ordnung *entarteter* Störungstheorie. Inwiefern liefert das Ergebnis Ihrer quantenmechanischen Rechnung eine Rechtfertigung semi-klassischer Näherungen?